Title	逆探索法を用いた正則単体分割の列挙(計算量理論)
Author(s)	正田, 備也
Citation	数理解析研究所講究録 (1994), 871: 241-247
Issue Date	1994-05
URL	http://hdl.handle.net/2433/84030
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

数理解析研究所講究録
871 巻 1994 年 241-247

逆探索法を用いた正則単体分割の列挙

正田 備也 (Tomonari MASADA)
（東京大学大学院 理学系研究科 情報科学専攻）
E-mail : masada@is.s.u-tokyo.ac.jp

Abstract

本稿では $\boldsymbol{R}^{d-1}$ に与えられた n 点の集合の正則単体分割すべてを列挙するアルゴリズムを提案する。このアルゴリズムは時間計算量 $O(r^2s^2l(s,r)T)$ 領域計算量 $O(ds)$ で列挙を完遂する。ここで、$r=n-d$、s は一つの正則単体分割に含まれる単体の数の最大値、T は固定された点集合から得られる正則単体分割の総数、$l(s,r)$ は r 変数 s 制約の線形計画問題を解くために必要な時間計算量である。

1 導入

本稿では、与えられた n 点の集合 $V=\{v_1,\dots,v_n\}$ から得られる正則単体分割 (regular triangulation, ＲＴと略す) すべてを列挙するアルゴリズムを与える。尚本稿を通じて、与えられた点が位置する空間の次元を $d-1$ と定める。こう定めると、単体を張る頂点数が丁度 d 個となる。また $r=n-d$ と定める。ＲＴは、すべての単体分割の重要な部分クラスをなしている。本節では、この部分クラスの特筆すべき性質を以下に挙げることをもって、ＲＴに注意を集中させる根拠に代えようと思う。

Delaunay 単体分割: [ES 92] は、ＲＴを Delaunay 単体分割（ＤＴと略す）の拡張概念として定義している。ＤＴは計算幾何学の分野において深く探求されている対象の一つである。与えられた点の間の距離によって定められる勢力分布図は Voronoi diagram として知られており、この図に双対な空間の分割としてＤＴを定義することができる。ここで、各点をその点を中心とする円（負の半径をもつ円も許す）によって置き換えれば、それぞれの半径によって「ゲタをはかされた」距離に対応した新たな勢力分布図を得る。これを power diagram と呼ぶ。そして、この図に双対な空間の分割としてＲＴを定義することができる。明らかに、ＤＴはＲＴの集合の要素（複数個ある場合は部分集合）となる。
辞書式（lexicographic）単体分割: [Lee 91] は、ＲＴについて注意深い諸考察を行っているが、その中で辞書式単体分割（ＬＴと略す）をＲＴの部分集合として理解し得ることを示している。ＲＴは、後に示すように所与の点集合の各点 v_i に重み w_i を与えることによって定義されるが、ＬＴは、ある特殊な仕方で重みを決めることにより得られるＲＴと考えることができる。
ＲＴの代数的側面: [St 91] はＲＴの代数的な側面を明らかにしている。与えられた点集合の点の間のアフィン従属関係から、アフィン・トーリック・イデアルと呼ばれるイデアル $\mathcal{I}_A$ を構成することができる。一方、各点 v_i へ重み w_i が割り当てられているときに得られるＲＴ Δ に対応して、Stanley -Reisner イデアル $\mathcal{I}_\Delta$ というイデアルを構成することができる。ここで、ベクトル $w=(w_1,\dots,w_n)$ を単項式順序 (term order) を定める重みベクトルと考え、$\mathcal{I}_A$

の Gröbner 基底を求める。すると、得られた Gröbner 基底の initial term の radical と、$\mathcal{I}_\Delta$ とが一致するのである。またこの論文には、特定の点集合（具体的には単体の積）のＲＴが数学の分野で興味をもって研究されていることが述べられている。詳細は当論文を参照されたい。

最後に、簡便さのために記法を定義しておく。添字の集合 $\{1, ..., n\}$ の、昇順に整列された大きさ k の部分集合の集まりを$\Lambda(n, k)$ によって表す。例えば$\sigma \in \Lambda(n, d)$ と書かれるとき、$\sigma = \{\sigma_1, ..., \sigma_d\}$ であり、$1 \leq \sigma_1 < \cdots < \sigma_d \leq n$ が満たされている。また、$\{1, ..., n\}$ に関するσの補集合をσ^*によって記すことにする。

2　逆探索法

本稿で提案するＲＴの列挙アルゴリズムは、**逆探索** (reverse search)[AF 92] [Fuk 93] という手法を利用している。この手法は、上手く適用された場合には入力データ以外に余分の領域計算量を必要とせずに所望の対象の全数探索を実現する。逆探索法は二つの概念、隣接関係 (adjacency) および局所探索 (local search)、からなっている。

隣接関係は、探索される対象すべてを結合するグラフを与える。このグラフは実際に構成されるわけではなく、隣接するものが必要に応じて計算される。次に、局所探索は、各対象から次にどの対象へと探索を進めるかを決定する。これによって、先に定められたグラフの spanning tree を得る。この spanning tree も実際に構成されるのではない。逆探索法は、この木を探索木と見做し、深さ優先式に探索を実現する。逆探索法を有効な手法たらしめている特徴は、局所探索が、探索木中で現在位置する頂点において得られる局所的な情報のみに基づいて実行されることである。例えば線形計画問題において、pivoting が隣接関係を規定し、例えば Bland の規則が局所探索を規定すると考えると、すべての基底解の列挙が実現される。詳細は、特に [Fuk 93] を参照されたい。

3　Gale 変換および二次扇の定義

本稿ではＲＴの定義を二つ与えるが、そのうちの一方で用いられる **Gale 変換**という概念を定義する。

定義 1 $\boldsymbol{R}^{d-1}$における n 点 $v_1, ..., v_n$の集合を Vとする。V の Gale 変換とは、n 個の添え字付けられた $r = n - d$ 次元ベクトルの集合$\bar{V} = \{\bar{v}_1, ..., \bar{v}_n\}$ で、以下の条件を満たすもののことである。第 i 列が $(v_i, 1)$ である $d \times n$ 行列を A とし、第 i 列が$\bar{v}_i$である $r \times n$ 行列を$\bar{A}$とする。このとき、$A\bar{A}^T = 0$ が成り立つ。

定義から明らかなように、ある点集合の Gale 変換は一意に定まらない。Gale 変換の多くの性質は [Gr 67] に詳しい。簡便さのために、以下のような用語を導入しておく。

定義 2 所与の点集合$V \subset \boldsymbol{R}^{d-1}$の Gale 変換を$\bar{V} \subset \boldsymbol{R}^r$とする。$\bar{V}$の部分集合$\bar{U} = \{\bar{v}_{i_1}, ..., \bar{v}_{i_k}\}$ ($i_1 < \cdots < i_k$とする。) について、これらのベクトルの正の実数による線形結合の集合、つまり

$$\{\bar{y} \in \boldsymbol{R}^r \mid \bar{y} = \beta_1 \bar{v}_{i_1} + \cdots + \beta_k \bar{v}_{i_k}, \beta_i > 0 \text{ for all } i\}$$

を、$\bar{U}$によって張られる *positive hull* と呼び、対応する添字の集合を用いて $\mathrm{pos}(\{i_1, ..., i_k\})$ と記す。

例えば、$\bar{V}$の部分集合$\{\bar{v}_{\mu_1},...,\bar{v}_{\mu_r}\}$が$\boldsymbol{R}^r$の基底をなすとき、$\mathrm{pos}(\mu)$は原点を頂点とする単体的な凸多面錐となる。このような$\boldsymbol{R}^r$の基底をなす大きさrの$\bar{V}$の部分集合たちは、原点を頂点とする単体的凸多面錐による$\boldsymbol{R}^r$の分割を引き起こす。所与の点集合Vから構成することのできるこの分割は、**二次扇** (secondary fan)[BFS 90] とよばれている。

4　RTの定義と二次扇の性質

本節ではRTの二通りの定義を与える。

定義 3（重み付けによる定義）$V = \{v_1, ..., v_n\} \subset \boldsymbol{R}^{d-1}$を所与の点集合とする。$V$の各点$v_i$に対し「重み」$w_i$を与え、その重みを各点の第$d$成分としたときの$\boldsymbol{R}^d$における点の集合を$V' = \{(v_1, w_1), ..., (v_n, w_n)\}$とする。$\mathrm{conv}V'$によって$V'$から構成される凸包を表すことにする。重みは$\mathrm{conv}V'$が単体的凸多面体となるように与えるものとする。このとき、$\mathrm{conv}V'$の下側のファセット（つまり、外向きの法線ベクトルの第d成分が負である$d-1$次元面）をx_d軸に垂直な超平面に投影して得られる単体分割を、重み付け$w = (w_1, ..., w_n)$によって引き起こされるRTと呼ぶ。

$\boldsymbol{R}^d$におけるn頂点からなる凸多面体の面数の上界が$O(n^{\lfloor d/2 \rfloor})$なので、この値を$s$とおくと定義3より以下の補題が成り立つ。

補題 1 $\boldsymbol{R}^{d-1}$に与えられた点集合Vの一つのRTに含まれる単体の数は$O(s)$である。

第二の定義は以下の通りである。

定義 4（Gale 変換を用いた定義）$V = \{v_1, ..., v_n\} \subset \boldsymbol{R}^{d-1}$を所与の点集合とする。また、$\bar{V} = \{\bar{v}_1, ..., \bar{v}_n\} \subset \boldsymbol{R}^r$を$V$のGale変換とする。$\boldsymbol{R}^r$の基底をなす$\bar{V}$の部分集合$\{\bar{v}_{\mu_1},...,\bar{v}_{\mu_r}\}$のうち、ある$r$次元ベクトル$\bar{z}$について$\bar{z} \in \mathrm{pos}(\mu)$を満たすものの集まりを$\Pi$とする。また、

$$\Delta = \{\sigma \in \Lambda(n, d) \mid \sigma = \mu^* \text{ for } \{\bar{v}_{\mu_1}, ..., \bar{v}_{\mu_r}\} \in \Pi\}$$

によって、$\Lambda(n, d)$の部分集合Δを定める。このとき、Δに対応するVの大きさdの部分集合の集まり$\{S \subset V \mid S = \{v_{\sigma_1}, ..., v_{\sigma_d}\} \text{ for } \sigma \in \Delta\}$を、$\bar{z}$によって引き起こされるRTと呼ぶ。

以上二つの定義が等価であることの証明は、[BFS 90][Lee 91] を参照されたい。本稿では、RTを、Vの大きさdの部分集合の集まりとしてよりはむしろ、定義4にあるように、大きさdの添字の集合の集まりとして、つまり、$\Lambda(n, d)$の部分集合として記述することにする。定義4より、以下の補題が帰結することに注意されたい。

補題 2 二つのr次元ベクトルは、同じRTを引き起こすならば、またそのときに限り、二次扇において同じセル（つまりr次元面）に属する。

補題 3 二次扇の各セル$c \in \boldsymbol{R}^r$は、以下のようなRTΔに対応しており、この対応は一対一である。

$$\Delta = \{\mu^* \in \Lambda(n, d) \mid \mu \in \Lambda(n, r) \text{ s.t. } \ c \subset pos(\mu)\}$$

5 アルゴリズム

この節では、逆探索法に則った正則単体分割列挙のアルゴリズムについて述べる。

隣接関係の検出: 隣接関係としては、定義4より、二次扇の各セルの間の隣接関係を用いる。よって、この隣接関係を検出することが課題となる。$c \subset \boldsymbol{R}^r$を現在位置しているセルとし、$\Delta$を補題3にあるように$c$に対応するRTとする。このとき、[ES 92] に述べられた一般の次元でのフリッピングが二次扇におけるある種の操作として解釈されることを証明できる。本稿ではその結果だけを示す。

定理 1 与えられたRTΔから、$\{v_{\rho_1},\dots,v_{\rho_{d+1}}\} \subset V$ なる点集合に関してフリッピングの操作を行い新たなRTΔ'を得ることは、Δに対応する二次扇のセル c から、それを区画 (bound) する $\mathrm{pos}(\rho^*)$ なる凸多面錐を横断しΔ'に対応するセルc'に到達することと等価である。

ここで、以下の系を見られたい。

系 1 $\mathrm{pos}(\nu)$ がc を区画するための必要十分条件は、c に対応するRTにおいて$\{v_{\nu_1^*},\dots,v_{\nu_{d+1}^*}\} \subset V$に関してフリッピングを行ない正則な単体分割を得ることである。

つまり、フリッピングの結果得られた単体分割が正則でなければ、$\mathrm{pos}(\nu)$ はc を区画していなかったと判断してよい、ということである。こうして、隣接関係を検出するアルゴリズムを提案する準備が整った。

アルゴリズム 1
入力: 正則な単体分割Δと、正整数j。
出力: jによって特定されるVの大きさ$d+1$の部分集合$\{v_{\rho_1},\dots,v_{\rho_{d+1}}\}$に関してフリッピングを行ない、正則な単体分割に移ることができる場合は、結果得られたRTを返す。そうでない場合は *NULL* を返す。
1. フリッピングを行いうる$d+1$個の点の集合を候補として調べ上げる。得られた候補の集合をΓ とする。
2. Γのj番目の要素を$U_\rho = \{v_{\rho_1},\dots,v_{\rho_{d+1}}\} \subset V$とする。
3. U_ρに関してフリッピングを実際行ってみる。結果得られた単体分割をΔ' とする。
4. Δ' が正則か否かを判定する。正則であればΔ' を、そうでなければ *NULL* を出力する。

定理1より1ステップ目では、二次扇において、横断する$r-1$次元面の候補を選んでいることになる。候補の総数については、定義3より以下の補題が成り立つ。

補題 4 ある正則単体分割Δにおいて、フリッピングを行いうる$d+1$点の集合の集まりΓの大きさ$|\Gamma|$は、$\boldsymbol{R}^d$におけるn頂点からなる凸多面体の$d-2$次元面の数の最大値、つまりsによって上から押えられる。

3ステップ目でU_ρに関するフリッピングによってΔから得られる単体分割Δ'を計算する。上記のアルゴリズムにおいて最も時間を費やす部分は、4ステップ目の正則性のチェックである。この問題は、r変数のs個の式からなる線形不等式系が解をもつか否かチェックする問題と等価であるので、r変数s制約の線形計画問題を一回解く際の時間計算量$l(s,r)$

を必要とする。（１ステップ目を省くと、制約数が rs 個になってしまう。）注意すべきは、s 個の制約を表現する一次式の係数、つまり超平面の法線ベクトルが明示的に与えられていないことであり、これは線形計画問題を解いている最中に要求に応じて計算することにする。一つの制約に関して行われる処理は、専らある点がその制約を満たすか否かの判定であるので、$\Theta(r)$ の計算量を要する。我々の問題では、この判定の度に法線ベクトルを $\Theta(r^3)$ の時間を費やして求めるので、時間計算量は$\Theta(r^2)$ 倍になる。従って、このアルゴリズムの時間計算量は $O(r^2 l(s,r))$ である。一方、領域計算量は $O(ds)$ に収まっている。（もし、s 個の制約の法線ベクトルを第４ステップ以前にすべて求めておくならば、時間計算量は $O(l(s,r))$ に減少するが、領域計算量が $O((d+r)s)$ となり、$r=n-d$ より、この値は実質的に $O(ns)$ になってしまう。）以上まとめると、

補題 5 隣接関係の検出に要する時間計算量は $O(r^2 l(s,r))$、領域計算量は $O(ds)$ である。

局所探索: 局所探索は、二次扇において現在位置するセルに隣接するセルのうち、なんらかの基準の下で最適なセルを探しそこへ移動するという操作である。本論文では、以下に定義される体積ベクトルと呼ばれる n 次元ベクトルを辞書式順で最大とするセルを最適なセルとする。

定義 5 正則単体分割Δが所与とする。このとき、Δの体積ベクトルとは、

$$\sum_{i=1}^{n}(\sum\{vol(\sigma)\mid\sigma\in\Delta\text{and }i\in\sigma\})\cdot e_i$$

と定義される n 次元ベクトルである。ここで、$vol(\sigma)$ とは単体 $\mathrm{conv}(\{v_{\sigma_1},\dots,v_{\sigma_d}\})$ の体積であり、e_iとは、第 i 成分のみが 1 で残りの成分は 0 の n 次元ベクトルとする。

この体積ベクトルに関して [BFS 90] に記された以下の定理は、我々の列挙アルゴリズムの正当性を直接に保証する結果であることを記憶に止めておかれたい。

定理 2 与えられた点集合 V から得られるすべてのＲＴについてその体積ベクトルを求め、それらを用いて凸包を構成すると $\boldsymbol{R}^n$ における凸多面体を得る。これを *secondary polytope* という。このとき、すべての体積ベクトルが *secondary polytope* の頂点であり、しかもその *face lattice* は二次扇の *face lattice* と互いに *anti-isomorphic* になる。

この定理は、上記の局所探索に基づく二次扇のセルの列挙が、座標値の辞書式順を局所探索で用いた secondary polytope の逆探索法による頂点列挙と等価であることを含意する（凸多面体の頂点の辞書式順による列挙については [Rot 92] を参照されたい）。従って、我々の局所探索によってすべてのＲＴを列挙する探索を実現し得る。アルゴリズムは以下の通りである。

アルゴリズム 2
入力: 正則単体分割Δ。
出力: 隣接する正則単体分割のうちその体積ベクトルが最大のものΔ_{max} 。
1. $j=0, \Delta_{max}=\Delta$とする。また入力のＲＴΔの体積ベクトルを求めておく。
2. 隣接関係を検出するアルゴリズムを用いて、隣接するＲＴのうち添え字 j に対応するものΔ' を求める。

3. Δ' の体積ベクトルを計算し、目下のところ最大であるΔ_{max} より辞書式順で大きければΔ_{max}を更新する。
4. $j = j + 1$ とし、2ステップ目へ戻る。

補題4より、jがとる値はs 以下なので、$j > s$ となり次第ループを終了すればよい。また $O(ds)$ を超える記憶領域は必要とされないので、次の結果を得る。

補題 6 局所探索に必要な時間計算量は $O(r^2 sl(s,r))$ 、領域計算量は $O(ds)$ である。

まとめ: 一般に、逆探索法を用いたアルゴリズムの時間計算量が、以下のようになることが知られている。

補題 7 *[Fuk 93]* 隣接関係の検出に $t(Adj)$、局所探索に $t(f)$ の時間計算量を要するとき、逆探索法を用いたアルゴリズムは、時間計算量 $O(\delta(t(Adj) + t(f))T)$ で列挙を完遂する。ここで、δは、列挙すべき対象間の隣接関係から引き起こされたグラフの頂点の次数の最大値、T は列挙すべき対象の総数とする。

我々の問題では$\delta = O(s)$ なので、補題5および6 より、正則単体分割の列挙アルゴリズムの計算量が以下のように求まる。

定理 3 $\boldsymbol{R}^{d-1}$におけるn 点の集合V から得られるすべての正則単体分割は、時間計算量 $O(r^2 s^2 l(s,r)T)$、領域計算量 $O(ds)$ で列挙できる。但し、$r = n - d$ であり、s はd 次元空間におけるn 頂点からなる凸多面体の面数の上界、$l(s,r)$ はr変数s 制約の線形計画問題を解くのに要する時間、さらにT は所与の点集合から得られる正則単体分割の総数である。

補遺: $d-1$ 次元におけるn 点から得られるRTの総数は$O(n^{(r-1)^2})$ であることが[BFS 90]に報告されている。従って、時間計算量$\Theta(n^{(r-1)^2})$ で列挙を終える[BFS 90] のアルゴリズムは、最悪の場合に最適なアルゴリズムであるが、$\Theta(n^{(r-1)^2})$ と莫大な量の領域計算量を必要とする点では有効でないことを付言しておく。

6 結論

本論文で、我々は与えられた点集合から得られるすべての正則単体分割を列挙するアルゴリズムを提案した。探索の手法としては、逆探索法という、領域計算量を縮減する点において極めて優れた手法を用いた。今後の課題は以下の通りである。

- より簡素な局所探索を案出する。本稿で提案した局所探索は、隣接するRTの体積ベクトルのうち最大のものを求めている。他のアイデアとしては、最大のものではなく単により大きな体積ベクトルを求め、さらに探索が巡回しないような条件を（例えば添え字を利用することにより）課すことが考えられる。

- 正則単体分割だけではなく、すべての単体分割を列挙するアルゴリズムを提案する。二次元の場合は、[Fuk 93] にも触れられているように解決済みである。しかし、[ES 92] には三次元の場合ですらすでに困難が生じる旨が述べられている。

謝辞: この問題の重要性に関して適切なアドバイスを電子メールを通じて寄せて下さった高山信毅氏、また、本研究の全体にわたって適切な指導を下さった今井浩助教授に感謝します。本稿についての一切の責任は私が負うべきであることは言うまでもありません。

参考文献

[AF 92] Avis, D., and K. Fukuda, A Pivoting Algorithm for Convex Hulls and Vertex Enumeration of Arrangements and Polyhedra, *Discrete & Computational Geometry*, Vol.8, 1992, pp.295-313.

[BFS 90] Billera, L. J., P. Filliman, and B. Sturmfels, Constructions and Complexity of Secondary Polytopes, *Advances in Mathematics*, Vol.83, 1990, pp.155-179.

[ES 92] Edelsbrunner, H., and N. R. Shah, Incremental Topological Flipping Works for Regular Triangulations, *Proc. 8th Annual Symposium on Computational Geometry*, 1992, pp.43-52.

[Fuk 93] Fukuda, K., Reverse Search and Its Applications, in *Discrete Structures and Algorithms II*, Kindai-kagaku-sha, Tokyo, 1993 (in Japanese).

[Gr 67] Grünbaum, B., *Convex Polytopes*, Interscience, London, 1967.

[Lee 91] Lee, C., Regular Triangulations of Polytopes, in *Applied Geometry and Discrete Mathematics*, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, Vol.4, 1991, pp.443-456.

[Rot 92] Rote, G., Degenerate Convex Hulls in High Dimensions Without Extra Storage, *Proc. 8th Annual Symposium on Computational Geometry*, 1992, pp.26-32.

[St 91] Sturmfels, B., Gröbner bases of toric varieties, *Tohoku Math. Journal*, Vol.43, No.2, 1991, pp.249-261.